

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PENGESAHAN I .....	ii
HALAMAN PENGESAHAN II.....	iii
KATA PENGANTAR .....	iv
ABSTRAK.....	v
ABSTRACT.....	vi
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR GAMBAR .....	xi
DAFTAR LAMPIRAN.....	xii
BAB I PENDAHULUAN .....	1
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	3
1.3 Batasan Masalah.....	3
1.4 Tujuan Penelitian .....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	5
2.1 Kanker Payudara .....	5
2.2 Farmakogenomik dan Pengobatan Presisi .....	5
2.3 Data Proteomik.....	7
2.4 Representasi Molekuler.....	9
2.4.1 <i>Morgan Fingerprint</i> .....	9
2.4.2 <i>Graph Neural Network</i> .....	11

2.5	<i>Machine Learning</i> .....	15
2.5.1	<i>Random Forest</i> .....	15
2.5.2	<i>Ensemble Boosting</i> .....	18
2.5.3	<i>Support Vector Machine</i> .....	21
2.5.4	<i>Multi-layer Perceptron</i> .....	23
2.6	Evaluasi Model.....	26
2.6.1	<i>Group Shuffle Split</i> .....	26
2.6.2	Metrik Evaluasi Kinerja .....	27
BAB III METODE PENELITIAN.....		32
3.1	Jenis dan Sumber Data .....	32
3.2	Variabel Penelitian .....	32
3.2.1	Variabel Prediktor .....	32
3.2.2	Variabel Target.....	33
3.3	Tahapan Analisis Data .....	33
3.4	Diagram Alir Analisis Data.....	37
BAB IV ANALISIS DAN PEMBAHASAN .....		38
4.1	Deskripsi Data Penelitian .....	38
4.1.1	Statistik Deskriptif Data Hasil Pra-pemrosesan.....	38
4.1.2	Distribusi Kelas Target .....	38
4.2	Hasil Ekstraksi Fitur Obat.....	40
4.2.1	Representasi <i>Morgan Fingerprint</i> .....	40
4.2.2	Representasi <i>Graph Neural Network (GNN)</i> .....	40
4.3	Evaluasi Model.....	41
4.3.1	Rekapitulasi Hasil Eksperimen .....	42

4.3.2	Visualisasi Perbandingan Kinerja .....	44
4.3.3	Analisis <i>Confusion Matrix</i> Model Terbaik .....	45
BAB V PENUTUP.....		47
5.1	Kesimpulan .....	47
5.2	Saran.....	48
DAFTAR PUSTAKA .....		50
LAMPIRAN.....		54